

Etude du comportement élastoplastique d'agrégats polycristallins par homogénéisation numérique FFT

A. Belkhabbaz^a, R. Brenner^a, B. Bacroix^a

a. Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux, CNRS, Institut Galilée, Université Paris nord, av. J.B Clément, 93430 Villetaneuse, France.

Résumé :

Les méthodes d'homogénéisation en champs moyens ainsi que la méthode des éléments finis sont habituellement utilisées pour décrire le comportement élastique et plastique des agrégats polycristallins. Dans ce travail, nous avons choisi de mettre en oeuvre une méthode d'homogénéisation en champs complets utilisant la technique des transformées de Fourier pour résoudre de manière itérative l'équation de Lippmann-Schwinger du problème hétérogène. Nous nous intéressons d'une part au rôle de la texture morphologique sur les réponses locale et effective et d'autre part à la régularisation du critère de plasticité à l'échelle des systèmes de glissement (c.à.d. la loi de Schmid). Différentes microstructures artificielles ont été générées à l'aide d'un processus de mosaïque de Voronoï afin d'étudier la sensibilité de la réponse à l'échelle globale et à l'échelle locale des agrégats, en particulier l'effet des grains voisins sur la dispersion de la mesure des champs locaux. Dans un premier temps, cette étude a été menée sur un polycristal ne présentant pas de texture cristallographique avec un comportement local élastique linéaire anisotrope. On montre une faible influence de la forme des grains sur la réponse du matériau.

Abstract :

Homogenization estimates based on the self-consistent scheme are customarily used to describe the elastic and plastic behavior of polycrystalline aggregates. In this work, we chose to implement a full field homogenization method using the technique of Fourier transforms to solve iteratively the equation of Lippmann-Schwinger problem of heterogeneous. We focus on the one hand the role of the morphological texture on local and effective responses and secondly on the regularised Schmid law on the scale of slip systems. Different artificial microstructures were generated using a process Voronoi tessellation to study the sensitivity of the response at both global and local scale, especially the effect of neighboring grains on the dispersion measurement of local fields. Initially, this study has been conducted for a polycrystal with no crystallographic texture with a local linear elastic anisotropic behavior. It shows a weak influence of grain shape on the material response.

Mots clefs : polycristal ; homogénéisation FFT ; fluctuation des champs locaux

1 Introduction

Les méthodes d'homogénéisation sont généralement utilisées pour décrire le comportement élastoplastique des agrégats polycristallins et étudier notamment le début de la plasticité que l'on appelle souvent microplasticité. Néanmoins, les modèles d'homogénéisation basés sur le schéma auto-cohérent (à partir de la résolution du problème d'inclusion d'Eshelby), généralement utilisés pour définir la contrainte d'écoulement dans les polycristaux, ne délivrent qu'un champ de contrainte moyen homogène au sein de chaque grain. L'usage de ces modèles, qui n'utilisent donc que le premier moment de la distribution des contraintes, mènent en général à une surestimation de la contrainte d'écoulement [3]. Afin d'améliorer cette estimation auto-cohérente sur la contrainte d'écoulement, nous proposons de prendre en compte toute l'information statistique disponible sur les champs locaux et d'étudier le lien entre l'anisotropie cristalline et la fluctuation de la mesure de ces champs. En effet, des travaux récents sur

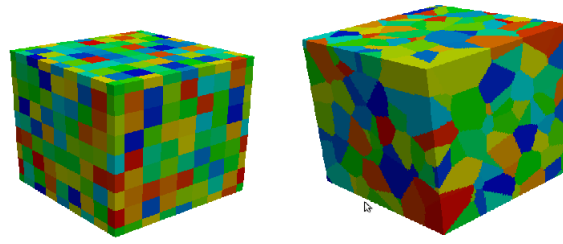


FIGURE 1 – Microstructure générée par mosaïque de Voronoï : à gauche distribution des germes suivant un réseau cubique simple et à droite distribution poissonnienne des germes.

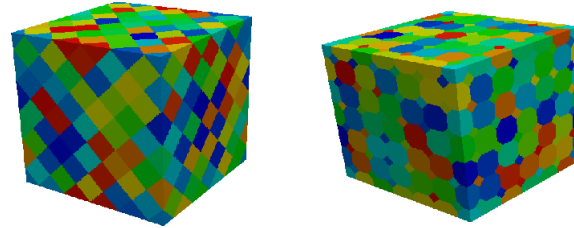


FIGURE 2 – Microstructure générée par mosaïque de Voronoï : à gauche distribution des germes suivant un réseau cubique à faces centrées et à droite distribution des germes suivant un réseau cubique centré.

l'influence de l'élasticité et de la plasticité cristalline sur la distribution des champs mécaniques à la surface des polycristaux, [8] et [9], mettent clairement en évidence l'influence de l'hétérogénéité élastique et notamment des fluctuations entre grains voisins sur la fluctuation des champs locaux. Cependant, à notre connaissance, peu d'études portent sur l'influence de la forme des grains constituant l'agrégat polycristallin sur la fluctuation des champs, et les travaux en cours ne prennent en compte, outre la loi de comportement du monocristal (systèmes de glissement et cisssions critiques associées), que l'arrangement spatial des grains et leurs orientations cristallographiques. La présente étude propose d'utiliser la méthode « FFT » en champs complets (développée au laboratoire LSPM) afin d'estimer plus précisément les réponses globale et locale d'agrégats polycristallins. Cette méthode, basée sur une description complète de la microstructure, permet en effet d'accéder à la distribution des champs aussi bien à l'échelle locale qu'à l'échelle globale de l'agrégat. Cet article sera consacré à l'évaluation de l'influence de différentes formes de grains générées par un processus de Voronoï sur la fluctuation des champs locaux dans le cadre de l'élasto-plasticité anisotrope avec élasticité linéaire et plasticité indépendante du temps.

2 Modèle de génération des microstructures : processus de Voronoï

Afin de tenir compte de la morphologie réelle (en 3 dimensions) des grains constituant notre agrégat, nous avons utilisé le processus de Voronoï, qui permet d'obtenir plusieurs types de morphologies, selon la répartition des germes : ceux-ci peuvent être distribués soit suivant un réseau régulier, soit de manière aléatoire (Figures 1 et 2). Dans ce travail, nous avons utilisé 3 types de réseaux réguliers différents, à savoir un réseau cubique simple, un réseau cubique centré et un réseau cubique à faces centrées. Notons que ces réseaux concernent la répartition des germes à partir desquels vont croître les grains de façon isotrope mais en aucun cas la structure cristalline de notre matériau qui sera dans tous les cas de structure cfc. Les figures 1 et 2 représentent les différentes types de microstructures obtenues, discrétisées en $128 * 128 * 128$ pixels, dans lesquelles chaque couleur représente une orientation cristalline donnée, et chaque grain contient en moyenne 4200 pixels. Notons également que la périodicité est imposée à ces différentes microstructures pour pouvoir utiliser la méthode FFT, qui n'est utilisable que pour des milieux périodiques.

3 Homogénéisation numérique en élastoplasticité cristalline par FFT :

A partir de la description complète de la microstructure de polycristaux, plusieurs approches numériques en champs complets peuvent être utilisées pour calculer la réponse mécanique. La méthode des éléments finis reste la plus utilisée. Dans ce travail, nous proposons la méthode initialement proposée par [4], qui est basée sur la technique de la transformée de Fourier rapide pour résoudre un problème local en homogénéisation sur une cellule de base périodique. La réponse mécanique locale d'un milieu hétérogène périodique peut être calculée comme une intégrale de convolution entre la fonction de Green du milieu linéaire de référence et le domaine de l'hétérogénéité réelle appelée vecteur de polarisation ; cette intégrale se réduit à un produit simple dans l'espace de Fourier. On peut noter que, par rapport aux éléments finis, cette méthode ne nécessite aucun maillage (la microstructure réelle d'un agrégat peut être prise directement dans le calcul) et est beaucoup plus efficace en temps de calcul. Voici à présent une description détaillée de l'implémentation de la FFT dans le cadre de l'élastoplasticité :

Pour un incrément de déformation donné : ε_n :

On calcul pour chaque point de la grille et sur chaque système de glissement σ_n et $\Delta\tau_c^k$:

1. la contrainte élastique $\sigma^E = \sigma_{n+1} + C : (\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1})$
2. la cission résolue de la contrainte : $\tau^k = \mu^k : \sigma^E$
3. Un test élastoplastique : (la loi de Schmid standard)
 - Si $\tau^k < \tau_{cn-1}^k$
 - (a) Alors : $\sigma_n = \sigma^E$ et $\Delta\tau^k = 0$.
 - (b) Sinon : $\sigma_n = \sigma^E - C : \Delta\varepsilon^P$ et $\Delta\tau^k = \sum h^{ks*} \Delta\gamma^{s*}$
4. avec $\Delta\varepsilon^P = \sum \mu^{s*} \Delta\gamma^{s*}$, et $s^* \in K^*$ (choisi parmi un groupe de système de glissement potentiellement actifs) et $\Delta\gamma^{s*}$ est donnée par la condition de cohérence et qui peut être calculée de la manière suivante :
 - (a) Etape 1 : On définit une matrice M par $M_{ik^*} = \mu^{k^*}, i \in [1, 6], k^* \in K^*$ avec μ^{k^*} le tenseur de Schmid de dimension (1×6) pour le système de glissement k^*
 - (b) Etape 2 : On vérifie l'indépendance linéaire entre les systèmes de glissement choisis dans le groupe K^*
 - Si $\| \det(M^T.M) \| = 0$ alors :
 - On retire un système de glissement au hasard parmi la liste active K^*
 - On revient à l'étape 1
 - (c) Etape 3 : La condition de cohérence est donnée alors par : $\Delta\gamma^{k^*} = \sum Y_{k^*j^*} \mu^{j^*} : C : (\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1})$ avec $X_{k^*j^*} = h^{k^*j^*} + \mu^{k^*} : C : \mu^{j^*}$ and $[Y] = [X]^{-1}$

4 Résultats et discussion :

4.1 Cas de l'élasticité : Influence de la microstructure sur la réponse globale et locale au sein d'un agrégat.

Afin de prévoir les propriétés effectives des différentes types de microstructures, nous avons calculé la moyenne de différentes propriétés sur un certain nombre de réalisations [7]. D'une manière générale et pour pouvoir attribuer à un milieu hétérogène les propriétés effectives d'un milieu continu et que ce dernier respecte l'hypothèse d'ergodicité exposée dans les travaux de [6], il est nécessaire que la moyenne stochastique d'une grandeur calculée en différents points aléatoires d'un volume élémentaire représentatif (VER) soit égale à la moyenne de cette même grandeur sur le volume total. Il a été montré dans le travail de [5] que les propriétés apparentes calculées sur un VER ne pouvaient coïncider avec les propriétés effectives d'un agrégat que si le VER était suffisamment grand. Pour pallier ce problème, ils ont proposé de calculer la réponse effective sur des volumes de taille intermédiaire mais en réalisant un grand nombre de calculs sur des réalisations différentes de la même microstructure du matériau aléatoire (la microstructure en termes de forme et taille de grains est figée, mais les orientations cristallines sont distribuées différemment de façon aléatoire sur cette microstructure).

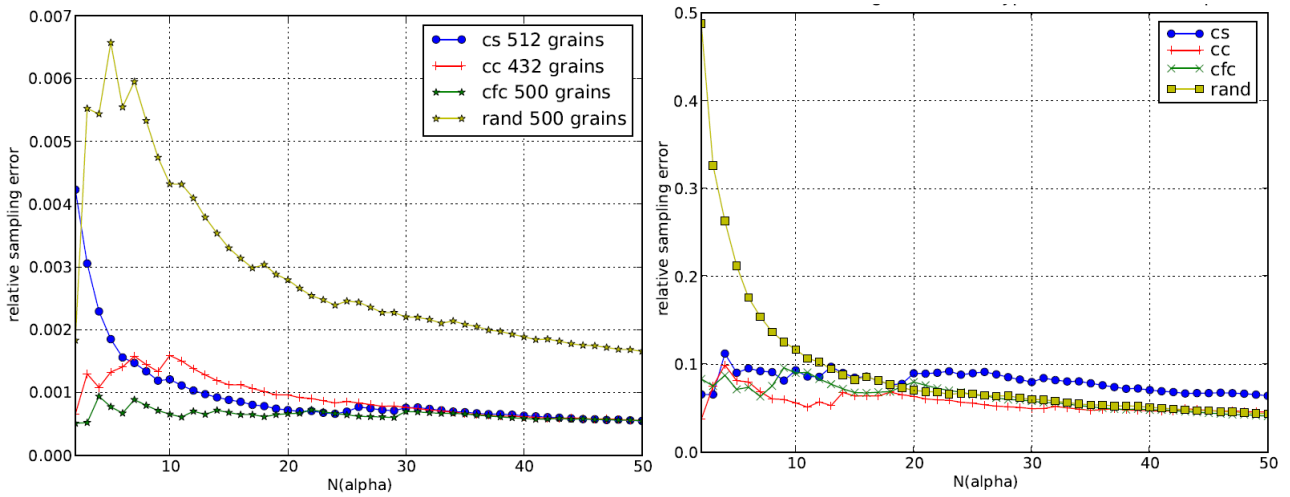


FIGURE 3 – Evolution de l’erreur d’échantillonnage en fonction du nombre des réalisations : à gauche l’erreur est calculée sur la contrainte équivalente du polycristal et à droite sur l’écart type de la contrainte équivalente au sein d’une orientation donnée.

On remplace donc un gros calcul par plusieurs petits calculs. Dans ce travail, nous définissons le VER comme le volume qui, à partir d’une réalisation N permet d’obtenir la propriété Z avec une erreur ε_t , appelée erreur d’échantillonnage.

A ce titre, nous avons considéré 50 réalisations équiprobables (tirage aléatoire des orientations sur la position des germes) pour les quatre microstructures étudiées, ce qui fait au total 200 calculs différents. Le matériau considéré dans cette étude élasto-plastique est le cuivre, de structure cristalline cubique à faces centrées, présentant un degré d’anisotropie élastique relativement élevé, caractérisé ici par le paramètre de Zener ($\alpha = 3.2$). Nous avons ensuite analysé nos résultats aux échelles globale et locale des agrégats. La figure 3 représente l’évolution de l’erreur d’échantillonnage sur la contrainte équivalente au sens de Von Mises en fonction du nombre de réalisations considérées. Cette contrainte est moyennée sur toute la microstructure à l’échelle globale et sur un grain (pris aléatoirement) à l’échelle locale. On remarque que, dans les deux cas, l’erreur décroît quand le nombre de réalisations augmente et qu’elle est très sensible à la morphologie des grains pour de petits nombres de réalisations. Il convient de noter également que, dans le cas de la microstructure aléatoire, la taille des grains est variable d’un grain à l’autre, ce qui induit des variations des fractions volumiques des orientations cristallines d’une réalisation à l’autre. La contrainte macroscopique dépend alors fortement de ces variations, ce qui induit une plus grande erreur d’échantillonnage que dans le cas de structures régulières pour lesquelles la taille, la forme et la fraction volumique de chaque grain est la même d’une réalisation à l’autre.

La figure 3 montre également que l’erreur obtenue à l’échelle locale est 100 fois plus grande qu’à l’échelle globale, ce qui est explicable par le fait que les grandeurs locales (écart type et moyenne au sein d’une orientation) sont fortement influencées par leurs entourages. On remarque également que pour un grain, toutes les courbes convergent vers une même valeur de la contrainte moyenne pour de grands nombres de réalisation sauf pour le cas de la microstructure Voronoï cubique simple en raison du plus petit nombre d’interfaces (et donc d’une plus grande influence des grains voisins) dans ce type de microstructure.

4.2 Réponse effective en élastoplasticité et distribution des champs :

Nous nous intéressons maintenant à la réponse effective en traction uniaxiale de différents types d’agrégats. Nous considérons dans cette étude que le cuivre ne se déforme plastiquement que par glissement sur les 12 systèmes appartenant à la famille octaédrique $\{111\} \langle 110 \rangle$. Par ailleurs, le calcul préliminaire présenté ici ne prend pas en compte d’écrouissage. La figure 4 montre un exemple de la réponse en traction uniaxiale de la microstructure de type Voronoï aléatoire ainsi que la distribution du champ ε_{33} durant le régime plastique. On remarque l’apparition des bandes de glissement ($\pm 45^\circ$) à travers

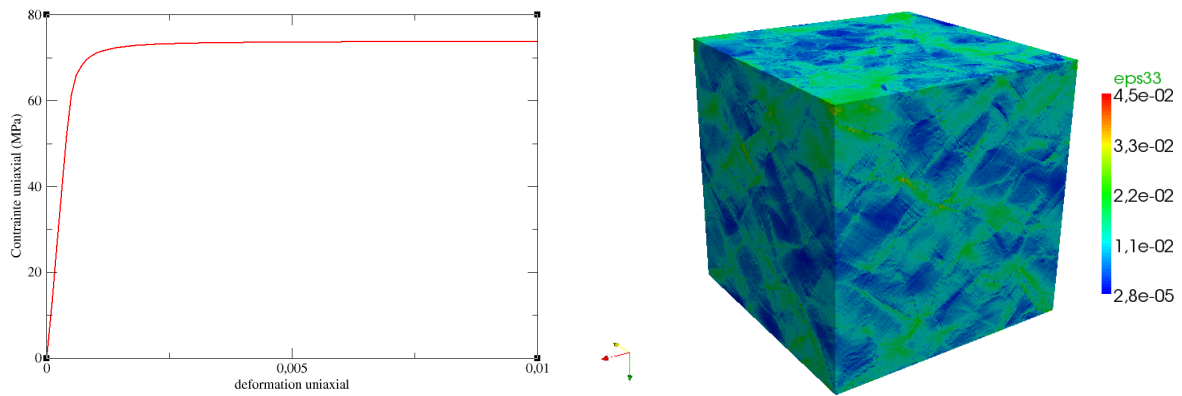


FIGURE 4 – À gauche, la réponse en traction uniaxiale de l'agrégat de type Voronoï aléatoire : à droite la distribution du champ ε_{33} dans le régime plastique.

plusieurs grains, ce qui est en très bon accord avec plusieurs observations expérimentales [2], et simulations par éléments finis[1].

5 Conclusions

Dans ce travail, nous avons étudié, à l'aide de la méthode FFT d'homogénéisation en champs complets, la réponse effective élastique et plastique de différentes microstructures générées par un processus de Voronoï en considérant différentes formes de grains. Cette étude menée dans un premier temps sur un polycristal ne présentant pas de texture cristallographique nous a montré que la forme des grains avait une faible influence sur la réponse mécanique du matériau en élasticité anisotrope et également au tout début de la plasticité. Nous poursuivons cette étude en l'étendant à l'étude de la plasticité avec écrouissage, en étudiant notamment différentes lois monocristallines (surface de plasticité et loi d'écrouissage).

Références

- [9] A. Zeghadi, S. Forest, A. Gourgues, O. Bouaziz, Ensemble averaging stress-strain fields in polycrystalline aggregates with a constrained surface – part 2 : crystal plasticity
- [1] F. Barbe, R. Quey, A. Musienko, G. Cailletaud, Three-dimensional characterization of strain localization bands in high-resolution elastoplastic polycrystals, *Mech. Res. Commun.* 36 (2009) 762–768.
- [2] P. Doumalin, Microextensométrie locale par corrélation d'images numériques, Ph.D. thesis, Ecole Polytechnique (2000).
- [3] Hutchinson J.W, 1970. Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites *Proceedings of the Royal Society of London A* 319 (1537), 247-272.
- [4] H. Moulinec, P. Suquet, A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 157 (1-2) (1998) 69 – 94.
- [7] K. Sab, On the homogenization and simulation of random materials. *Eur. J. Mech. A/Solids* 11, 585 – 607
- [5] T. Kanit, S. Forest, D. Jeulin Determination of size of the representative volume element for random composites : statical and numerical approach, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 40 (1-2) (2003) 3647–3679.
- [6] Kroner E. Linear properties of random media. The systematic theory. In : *comportement rhéologiques et structure des matériaux*, éd. CR 15^{ème} Coll. Groupe français de rhéologie, pp 15–40
- [8] M. Sauzay, Cubic elasticity and stress distribution at free surface of polycrystals. *Acta Mater.* 55, 1193–1202.